



HAL
open science

Duplex $\alpha+\alpha'$ 組織を呈す Ti-6Al-2Sn-4Zr-2Mo-Si 合金の優れた引張強度-延性バランス：実験研究と機械学習を援用した組織因子の影響

Irvin Séchepée, Paul Paulain, Yuka Nagasaki, Riku Tanaka, Hiroaki Matsumoto,
Vincent Velay

► To cite this version:

Irvin Séchepée, Paul Paulain, Yuka Nagasaki, Riku Tanaka, Hiroaki Matsumoto, et al.. Duplex $\alpha+\alpha'$ 組織を呈す Ti-6Al-2Sn-4Zr-2Mo-Si 合金の優れた引張強度-延性バランス：実験研究と機械学習を援用した組織因子の影響. 日本金属学会誌 / Journal of Japan Institute of Metals / Nippon Kinzoku Gakkaishi, 2024, 88 (12), pp.375-384. <10.2320/jinstmet.JC202410>. <hal-04832080>

HAL Id: hal-04832080

<https://imt-mines-albi.hal.science/hal-04832080v1>

Submitted on 6 Jan 2025

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire HAL, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



HAL Authorization

Duplex $\alpha+\alpha'$ 組織を呈す Ti-6Al-2Sn-4Zr-2Mo-Si 合金の優れた引張強度-延性バランス：実験研究と機械学習を援用した組織因子の影響*1

イルビン セシュペ^{1,*2} ポール ポーラン^{1,2} 長崎由佳^{1,*2} 田中莉久^{1,*2}
松本洋明^{1,*3} ビンセント ブレイ³

¹ 香川大学創造工学部

² コンピュータ工科大学

³ アルビ鉱山大学

J. Japan Inst. Met. Mater. Vol. 88, No. 12 (2024), pp. 375-384

Special Issue on Recent Research and Development in the Processing, Microstructure, and Properties of Titanium and Its Alloys

© 2024 The Japan Institute of Metals and Materials

Excellent Balance of Ultimate Tensile Strength and Ductility in a Ti-6Al-2Sn-4Zr-2Mo-Si Alloy Having Duplex $\alpha+\alpha'$ Microstructure: Effect of Microstructural Factors from Experimental Study and Machine Learning

Irvin Séchepée^{1,*2}, Paul Paulain^{1,2}, Yuka Nagasaki^{1,*2}, Riku Tanaka^{1,*2}, Hiroaki Matsumoto^{1,*3} and Vincent Velay³

¹ Department of Advanced Materials Science, Faculty of Engineering, Kagawa University, Takamatsu 761-0396

² Université de technologie de Compiègne, Compiègne 60203, France

³ Université de Toulouse, CNRS Mines Albi, INSA, ISAE, ICA (Institut Clément Ader), Albi Cedex 09, France

This research focuses on the systematic study of a Ti-6Al-2Sn-4Zr-2Mo-Si titanium alloy and the characterization of $\alpha+\beta$ (equiaxed and bimodal) and $\alpha+\alpha'$ (duplex) microstructures. It provides more insights on the outstanding advantages of the duplex ($\alpha+\alpha'$) microstructure, especially on its exceptional work hardening and strength-ductility balance. The heat treatment conditions required to form equiaxed, bimodal and duplex microstructures and their effects on the grain size and the phase proportion are discussed. It shows how the microstructural parameters can be controlled thanks to the heat treatment temperatures, the holding times and possible aging processes. The influence of such microstructural factors on the tensile properties of each alloy is investigated, especially on strength (proof stress, ultimate tensile strength), ductility (plastic elongation) and work hardening properties. The duplex ($\alpha+\alpha'$) microstructure is compared with the equiaxed and bimodal microstructures and its advantages are displayed, highlighting the better strength-ductility balance and superior work hardening properties of the duplex microstructure. Indeed, the deformed microstructure of the duplex ($\alpha+\alpha'$) microstructure reveals more homogeneous strain partitioning than that of the bimodal ($\alpha+\beta$) microstructure. Thus, this work proved the potential of an optimized duplex ($\alpha+\alpha'$) microstructure for the enhanced tensile properties at room temperature. Finally, a machine learning model using gradient boosting regression trees is used to quantify the importance of the microstructural factors (type of microstructure, grain size and phase ratio) on the mechanical properties.

[doi:10.2320/jinstmet.JC202410]

(Received July 1, 2024; Accepted August 5, 2024; Published November 25, 2024)

Keywords: Ti-6Al-2Sn-4Zr-2Mo-Si alloy, α' martensite, strength-ductility balance, work hardening, machine learning

1. 緒言

チタン(Ti)合金は、高耐食性、優れた高温特性、高い比強度[1-3]の優れた特性を呈すことから軽量構造材料で期待されている。チタン合金は、航空宇宙分野、生体医療分野、防衛産業分野など、多くの分野で適用される重要な材料であり、世界的に多くの研究が行われている[1, 3]。中でも Ti-6Al-4V (Ti-64) 合金は、優れた特性のバランスを呈し、産業界で最

も使用されている Ti 合金である[4-6]。さらに、Ti-64 合金に比べ高温特性を改善するために開発された Ti-6Al-2Sn-4Zr-2Mo-Si (Ti-6242S) 合金がある[7]。しかし、鋼などの汎用金属と比較すると、Ti 合金の加工硬化性は小さく[8]これを増加させることは(高強度-高延性を維持しながら)[9]、均一変形性、韌性、耐破壊進展性、エネルギー吸収性[10]を改善するためにも重要である。

加工-熱処理プロセスにより Ti 合金において様々な微細組織を制御し、最適な機械的特性を得ることができる。つまり熱処理温度・保持時間のプロセス条件を適切に制御することで、微細組織因子(粒径や相分率など)を適切に制御・管理することが可能となる[11-13]。これらの様々な微細組織因子は機械的特性に強く影響を及ぼす[12, 14]。例えば Hall-Petch 則はミクロスケールでの微細組織因子をマクロスケールにおけ

*1 Mater. Trans. **64** (2023) 111-120 に掲載。3.1.4 項にて Fig. 7(a) と表記。試料の呼称において Duplex($\alpha+\alpha'$)組織、Bimodal($\alpha+\beta$)組織など、構成相を付記。

*2 香川大学大学院生(Graduate Student, Kagawa University)

*3 Corresponding author, E-mail: matsumoto.hiroaki@kagawa-u.ac.jp

る機械的特性(この場合では結晶粒径と材料強度の関係性)を関係付けるためにも有名な関係式である[15-17]. ($\alpha+\beta$)型 Ti 合金では, 機械的特性を制御するために平衡相(α 相および β 相)において組織制御は確立されている[18]. 本研究では, Ti-6242S 合金における非平衡相(α' マルテンサイト(HCP 構造))を起点とした新しいタイプの組織制御に着眼し, 機械的特性のさらなる向上とそのバランスを高度化することを目指している.

一般に Ti 合金において, α' マルテンサイト組織における機械的特性は極めて悪いことが知られている. そのため, マルテンサイト組織自体で使用されることはなく, 一方で β 相[19, 20]に分解され, 利用される. しかしながら, α' マルテンサイトにて α 相と共存した Duplex($\alpha+\alpha'$)組織では極めて優れた機械的特性を呈す. Ti-64 合金における研究成果では, Duplex($\alpha+\alpha'$)組織において熱処理温度を調整することにより α 相と α' の相分率を制御することができ, 優れた加工硬化性にも伴い, 良好な強度・延性特性[10, 21-23]を示すことが知られている. 詳細には, 著者らは以前に Ti-64 合金について, $\alpha+\alpha'$ 組織(Duplex($\alpha+\alpha'$))における高延性の起源は, 活発な $\{10\bar{1}1\}$ 双晶の活動(α' マルテンサイト変態前に保持された旧 β 粒域での V 濃化に起因する)と, その双晶運動(界面移動)がより容易になったことに起因することを報告している[21]. 加えて, Dumas らは最近, Ti-64 合金にて $\{13\bar{4}1\}$ 双晶が内部で生成された Duplex($\alpha+\alpha'$)組織では, この $\{13\bar{4}1\}$ 双晶境界[10]の再配列過程が頻繁に起き高延性を呈すことを報告している. そのために, 最適な $\alpha+\alpha'$ 組織を呈す Ti 合金では, 従来の($\alpha+\beta$)組織よりも優れた強度-延性バランスおよび良好な加工硬化性を発現させることが期待できる. これまでのところ, Duplex($\alpha+\alpha'$)組織を呈す Ti 合金における強度, 延性, 加工硬化挙動に及ぼす結晶粒径および α' 分率の影響について従来の平衡($\alpha+\beta$)組織と比較した体系的な研究成果の報告はほとんどない. 加えて, Ti-6242S 合金における α' マルテンサイト組織に着眼した機械的特性に関する報告はない.

Ti 合金の合金設計においては, 組成, 微細組織, プロセス条件などの多くの作用因子を考慮する必要がある. これらの複雑な関係性を解明する必要がある. これらの作用因子間の関係性のほとんどが非線形的であり, 精緻に予測することは困難である. そのため最近では, 微細組織と特性の間の複雑な関係性をより精緻に明らかにするためにも材料科学の分野で機械学習を積極的に活用した研究が注目を浴びている. これまでの研究成果の事例では, Ti 合金の引張特性または疲労特性をモデル化するために, 化学組成[24], プロセス条件[25], またはその双方[26-29]での連関性について明らかとした興味深い結果が報告されている. 他の研究成果においても, 機械的特性の予測にて微細組織因子を使用した場合など, 多様な観点から研究が実施されている[18, 30]. これらの機械学習を利用した研究アプローチを駆使することで, 所望の機械的特性を得るための微細組織・プロセス条件を予測する逆解析も可能となる[31]. 加えて, 機械学習を利用した研究アプローチでは結果(特性)を予測するために活用されるだけでなく, 予測パラメータにおける重要度を解析するためにも利用できる. 例えば, 著者らの以前の研究[18]では, Ti-

5Al-2Sn-2Zr-4Cr-4Mo(Ti-17)合金の($\alpha+\beta$)-ラメラ, Bimodal, および等軸微細組織における組織群において, 強度での耐力にて多様な組織因子の中で初析 α 相分率が強度に強く影響することを示している. 加えて, 文献[30]の結果(Ti-64 合金)では降伏強度において, β 分率が最も強い影響度で作用し, 他方で加工硬化性においては粒径, ひずみ速度, および β 分率の組織因子の間でほぼ同等な影響度を示すことが示されている.

本論文では, Ti-6242S 合金の等軸 ($\alpha+\beta$) 組織, Bimodal($\alpha+\beta$)組織と比較した Duplex($\alpha+\alpha'$)組織の体系的な研究に着眼する. これにより, Duplex($\alpha+\alpha'$)組織で発現する優れた加工硬化性と強度-延性バランスの結果について報告する. 本研究では, 組成, 結晶粒径, 組織形態, 相分率(α/β 分率または α/α' 分率)が機械的特性に及ぼす影響を実験的に明らかとする. 加えて, 各種組織因子と機械的性質の連関性をより定量的に評価. 解析するためにも機械学習を実施した. ここでは Ti-6242S 合金の室温における機械的特性を高度化するための Duplex($\alpha+\alpha'$)組織の性質・可能性を明らかにすることを目的としている.

2. 実験方法

2.1 熱処理

本研究では, チタン合金 Ti-6Al-2Sn-4Zr-2Mo-Si(Ti-6242S)について研究を実施した. 本研究で使用した Ti-6242S 合金の化学組成(mass%)は, 6.1Al, 2.0Sn, 4.1Zr, 2.0Mo, 0.12Si, 0.1O, 0.02N, 残部 Ti である. 厚さ 4 mm(W20mm-L35 mm)の As-received 材を 850°C で熱間圧延し(1 パス 0.5 mm, 各パス毎の保持時間 4 min), 厚さ 1.3-1.4 mm の圧延板を得た. この板材について, 特定の熱処理条件の中で異なる組織を形成し, ここでは β 変態点 990°C 以下の温度で熱処理を実施した. これらの熱延板を用いて, 3つのタイプ(等軸 ($\alpha+\beta$), Bimodal($\alpha+\beta$), Duplex($\alpha+\alpha'$))の微細組織を評価した. 等軸組織を形成させるために, 800°C または 900°C の熱処理温度で, 30-240 min で保持時間を調整して熱処理を実施, その後に冷却(C), より具体的には空冷(AC)もしくは炉冷(FC)した(Fig. 1(a)を参照). 計 11 種類の熱処理条件で等軸組織を形成した. Bimodal 組織では, 等軸組織と同じ条件で熱処理し, その後にさらに時効熱処理を施した. ここでは, 450°C, 550°C, 650°C の時効温度で, 120 min の保持時間で熱処理後, 油焼入れ(Q_o)を行った(Fig. 1(a)参照). ここで, 時効熱処理はアルゴン雰囲気中で実施している. この時効熱処理過程においては, $\alpha+\beta$ ラメラが旧 β 粒の内部に生成され, 9つの異なる Bimodal 微細組織を準備した.

加えて, 初析 α 相と α' マルテンサイトから構成する Duplex 組織では α' マルテンサイト相を生成するために, 合金を 850-980°C の温度で 15 min 溶体化処理した後, 氷水中に急冷(Q_w)して組織制御を施した(Fig. 1(b)参照). ここで急冷は, 準安定な α' を室温で安定に生成するために実施した(急冷しなければ, 徐冷中に拡散が律速され α' ではなく平衡な ($\alpha+\beta$)相が生成される). この Duplex 組織では, 9条件の熱処理条件で異なる組織を準備した.

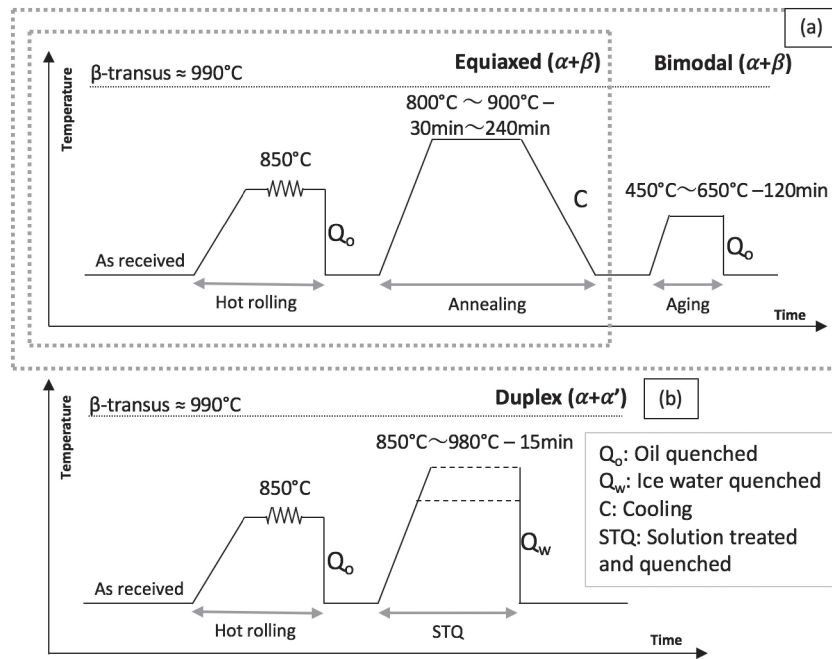


Fig. 1 Heat treatment processes for (a) equiaxed ($\alpha+\beta$) and bimodal ($\alpha+\beta$), and (b) duplex ($\alpha+\alpha'$) microstructures.

2.2 組織評価

微細組織は、HKL Channel 5 ソフトウェアを搭載した電子後方散乱回折 (EBSD) 分析器を備えた日本電子 (株) JSM-7001F 電界放出銃型走査電子顕微鏡 (FE-SEM) で観察・評価した。また、透過型電子顕微鏡 (TEM) (日本電子 (株) JEM 2100F) により α' マルテンサイトの形態を観察した。組織因子 (結晶粒径, 相比) は ImageJ ソフトウェアで定量測定した。各組織における平均粒径の測定では統計学的アプローチを採用し、より正確に測定を実施するために、1つの組織に対し総計 80 の結晶粒での測定となるように、2-3 枚の SEM 画像のそれぞれについて 30-50 個の結晶粒の表面積を測定した。ここでは平均結晶粒を球状の物体 (2次元では円形) とみなし、以下の式により等価平均結晶粒径を計算した。 $d_{eq} = 2\sqrt{S/\pi}$ (S の表面積 (μm^2)) となる。

2.3 引張試験

機械的特性 (0.2% 耐力, 引張強さ (UTS), 破断伸び) は引張試験により測定・評価した。引張試験片 (薄い酸化層を除去するために熱処理後の試料表面は機械的に研磨した) の寸法は、厚さ 1.0-1.2 mm で幅 2 mm, 長さ 10.5 mm で、引張方向が圧延方向 (熱処理前) と平行になるように加工した。引張試験は室温-大気中で初期ひずみ速度 $5 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ で実施した。

2.4 機械学習

機械的特性に及ぼす組織因子の影響をより定量的にも明らかとするために、機械学習を援用した統計的アプローチから解析した。ここでは Python のオープンソース scikit-learn ライブラリ (v.0.24.1) を利用して、機械的特性を予測するための回帰モデルを構築した。

結晶粒径, 相構成, 相分率 (α/β , α/α') などの組織因子が引張特性に及ぼす影響をより定量的に解明するために、機械

学習を用いた統計的アプローチを援用した。本研究では計 37 セットの組織因子と機械的特性の関係性から構成されたデータセットを基に評価している。ここでは 29 の出発組織のデータセット (等軸 ($\alpha+\beta$) 組織: 11 組織, Bimodal ($\alpha+\beta$): 9 組織, Duplex ($\alpha+\alpha'$): 9 組織) に対して、データサイズのバランスを考慮して他 8 組織の重複データを追加して機械学習解析を実施した。これらの 8 つの重複データについては、組織因子 (結晶粒径と相量比) はおおよそ近い値を示すものの、Duplex 組織を呈す試料の中で 4 つの機械的特性が異なるデータセットを追加で導入している。より詳細 (重複データ) (Duplex ($\alpha+\alpha'$) 組織に対して) には、同一な熱処理条件の試料に対して引張試験を 3 回実施しているため、これらの 3 つの試料においてもそれぞれでわずかに組織因子・機械的特性の値がわずかにでも変化しているために、それらのデータを重複データとして活用している (出発データから 1 つ, 複製データから 2 つ)。これらのすべてのデータセットにおいて耐力, UTS, 塑性伸び, および加工硬化指数の変動係数は、それぞれ 2.99%, 1.76%, 14.3%, 7.45% であった。したがって、総計 37 セットのデータセットは等軸 ($\alpha+\beta$) 組織 11, Bimodal ($\alpha+\beta$) 9, Duplex ($\alpha+\alpha'$) 組織 18 で構成される。ここでは、データセット数が非常に少ないために、ニューラルネットワークのようなアルゴリズムは不適であり、実際、このようなアルゴリズムが適切に回帰性能を上げるためには、より大きなデータセット数を要する。その結果、決定木のような複雑な数理モデルを使用しない比較的単純なモデルが適している [32]。この決定木モデルの中では、回帰の安定性と精度の観点から、勾配ブースティング・アルゴリズムが最適であると判断される [33, 34]。これらの機械学習から得られる特徴量の重要度解析 (パラメータ間の依存度の影響が小さい順列型重要度を導出している [35]) により、各組織因子が機械的特性にどのように影響するか相関性を定量的に明らかにすることが可能となる。

3. 結果と考察

3.1 実験結果

3.1.1 代表的な微細組織

本研究では、異なる微細組織を呈す $\alpha+\beta$ 型 Ti 合金である Ti-6242S の特性を評価した。特に、等軸 ($\alpha+\beta$) 組織、Bimodal ($\alpha+\beta$) 組織、および Duplex ($\alpha+\alpha'$) 組織に着眼している。前者 2 つは平衡組織であり、他方で後者の Duplex ($\alpha+\alpha'$) 組織は準安定組織である。本合金における β トランザス (約 990°C) 以下の温度で熱処理を施すことで 2 相 (α 相, β 相) が共存する。主相である α 相は六方最密充填 (HCP) 構造を有し、SEM 写真からは黒色相に相当する (Fig. 2(a) 参照)。他方で β 相は体心立方 (BCC) 結晶構造を有し、SEM 写真では白色の相に相当する。

等軸 ($\alpha+\beta$) 組織について、代表的な組織形態を Fig. 2(a) に示す。この等軸組織では、球状の主相 α 粒によって特徴付けられ、その径が熱処理条件によって異なる [1, 3]。ここで、 α 粒は保持時間が長いほど粗大化することが確認された (静的再結晶過程)。本研究の結果では、所定の処理温度 (900°C) において粒径は 2.50 μm から 3.94 μm まで粗大化する。さらに、処理温度 (800°C または 900°C) を変更することで、粒径も顕著に異なってくる [1, 3]。保持時間が同じ条件では、800°C の方で 900°C の粒径値より微細化される (800°C-240 min と 900°C-240 min と比較した場合の粒径値はそれぞれ 2.46 μm 対 3.94 μm)。一方で、相分率は同一な熱処理温度であれば保持

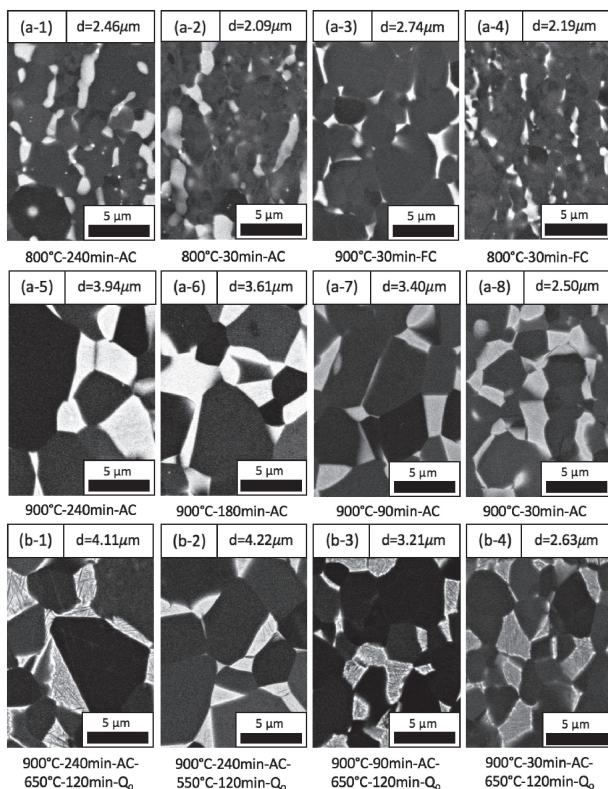


Fig. 2 SEM micrographs of the (a) equiaxed ($\alpha+\beta$) microstructure and (b) bimodal ($\alpha+\beta$) microstructure. Herein, heat treatment conditions are also depicted (d stands for grain size, AC for air cooling and Q_o for oil cooling).

時間には依存しない (900°C の各保持時間に対して、 α 相分率は約 76%)。一方で熱処理温度を変更することで、相量比は変化する [1, 3]。900°C では α 相分率は 76% で、他方で 800°C でそれは 87% であった。一般的に等軸微細組織・球状化結晶粒組織では、引張特性で高延性 (伸び) を示す傾向にある [1, 3, 26]。よく知られているとおり、形態・粒径に代表される組織因子は強度や延性などの機械的特性に強く影響を及ぼし、適切に制御することが重要である [1, 3]。この組織の機械的特性に及ぼす影響 (実験結果) については、3.2 節で後述する。

さらに、代表的な Bimodal ($\alpha+\beta$) 組織を Fig. 2(b) に示す。この Bimodal ($\alpha+\beta$) 組織の生成を目的に時効熱処理を施しており、この時効により旧 β 粒の内部に α ラメラが生成される。この旧 β 粒内で生成する α ラメラのサイズ (幅) および分率も、時効熱処理条件に依存する。この時効熱処理温度の影響では、代表的に Fig. 2(b) の SEM 写真 15(b-1) と (b-2) で示している。650°C の時効熱処理温度では、550°C の時効温度よりもより多くの α ラメラが生成する。この時効熱処理過程において、650°C 時効でも直前での熱処理組織における結晶粒径や初析 α 相分率には影響しない。Fig. 2(b) では、異なる保持時間 (それぞれ 240 min, 90 min, 30 min) における組織 (b-1), (b-3), (b-4) を比較すると、保持時間が 240 min の際、90 min や 30 min の場合よりも微細なラメラが生成されていることがわかる。Bimodal ($\alpha+\beta$) 組織の場合、($\alpha+\beta$) ラメラの形成に伴い強度は大幅に増加するが、延性は等軸組織に比べ低下する [36, 37]。機械的特性の詳細な結果については、後述する。

Duplex ($\alpha+\alpha'$) 組織について、Fig. 3 にいくつかの代表組織を示しており、急冷 (焼入れ) により、残留 β から針状 α' マルテンサイト (HCP) 変態が起きていることが特徴付けられる。Fig. 3 では、白色の領域が針状 α' マルテンサイトが生成した領域に相当する。 α' マルテンサイトは従来、単一組織では強化される一方で、延性は著しく低下されることが知られてい

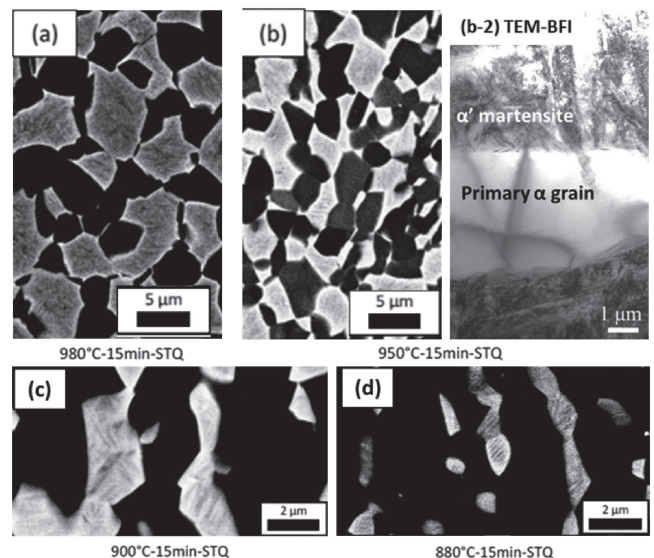


Fig. 3 SEM micrographs of the duplex ($\alpha+\alpha'$) microstructure. (a) 980°C-15 min-STQ (Solution treated and quenched), (b) 950°C-15 min-STQ, (c) 900°C-15 min-STQ, (d) 880°C-15 min-STQ. And (b-2) bright field TEM image on the 950°C-15 min-STQ sample.

る[38]. しかしながら, Duplex($\alpha+\alpha'$)組織では, α と α' が共存するため, 両相が同じ HCP であることから, 粒界での適合性が担保される. そのため, 延性の改善が観察されるようになる. この Duplex($\alpha+\alpha'$)組織では α' 由来で著しく高い加工硬化性と高延性を呈することが報告されている[10, 19-21]. この α' マルテンサイトの形態については, Fig. 3(b-2) の TEM 像から極めて微細な針状 α' マルテンサイトが旧 β 粒中にて形成されていることが観察できる. この α' マルテンサイト域では, フリンジ回折コントラストが強く観察され, これは高密度の転位が蓄積されていることを示唆している. この Ti 合金で生成される α' マルテンサイトの典型的な特徴として, β/α' マルテンサイト変態の過程で多数の $\{10\bar{1}1\}$ 双晶が格子不変変形モードとして生成することが挙げられる[39]. 等軸組織と結果と同様に熱処理温度の低下に伴い初析 α 相(黒色相)の分率は増加し, この熱処理温度に依存した相量比の変化は Fig. 3 で確認できるとおりである. ここでは保持時間が短い(15 min)ため, 結晶粒成長も主に加熱温度に影響される.

以下では, 結晶粒径, 相分率, および Duplex($\alpha+\alpha'$)組織の機械的特性(強度, 延性, 加工硬化性)に及ぼす影響について詳細に報告する.

3.1.2 引張特性

耐力, UTS, 塑性伸び, 加工硬化性などの機械的特性を評価するために, 圧延材の圧延方向に沿って一軸引張試験を実施し, 組織の影響を評価した(Fig. 4). 加えて機械的特性に及ぼす結晶粒径および相量比の影響も評価した(Fig. 5).

Fig. 4(a) では等軸($\alpha+\beta$)組織の場合における代表的な塑性応力-ひずみ曲線(全 11 種類の中から代表的な結果を表示)を示している. ここでは 2 つのグループに分けられた特徴があることがわかる. 例えば 900°C の熱処理温度で保持時間(30-240 min)を変化した試料では, 中程度の強度を呈しながらも高い加工硬化特性を示している(Fig. 4(a)). このような特性は, β 分率が高く(約 24%), 粒径が粗大であること(2.5-4.0 μm)に起因する. 他方で, 800°C での熱処理材および炉冷(空冷より遅い冷却)材では, 900°C での熱処理材と比較して加工硬化性は低い一方で強度は高かった. この特性は β の相分率が低く(約 12%), 微細粒組織(2.0-2.7 μm)であることに起因する.

Bimodal($\alpha+\beta$)組織を呈す代表的な試料の応力-ひずみ応答について Fig. 4(b) にプロットしている(計 9 試料). 時効処理の影響では, Fig. 4(a) Fig. 4(b) を比較することで評価できる. 予想されるとおり, 同様な熱処理条件(例えば 900°C-240 min-AC)からの時効処理(450°C, 550°C, 650°C)で著しく高強度化される. 強度はいずれの条件でも改善されるものの, 一方で前熱処理の保持時間 240 min では高延性は維持されるが保持時間 30 min の Bimodal($\alpha+\beta$)組織ではわずかに延性は低下し, 90 min の保持時間の場合ではより大きく低延性化される. ここで低延性で高強度な試料では, 初析 α が微細(約 2.7 μm)で, 他方で初析 α の相分率が小さい(約 76%)組織で観察されている. 対照的に, 初析 α 粒が粗大(4.2 μm)で, 初析 α の相分率が大きい(約 80%)組織では, 高強度-高延性のバランスに優れた特徴を示す.

Duplex($\alpha+\alpha'$)組織では, 熱処理温度を 850°C から 980°C まで変化, 保持時間を 15 min で固定して熱処理・溶体化処理を施しており, 微細な結晶粒組織が観察されている. そのため, 準備した 9 種類の Duplex($\alpha+\alpha'$)組織において, 結晶粒径(初析 α 粒)と相量比の関係では比例関係が観察された. 溶体化熱処理温度が高い場合では, α' マルテンサイトが多量に生

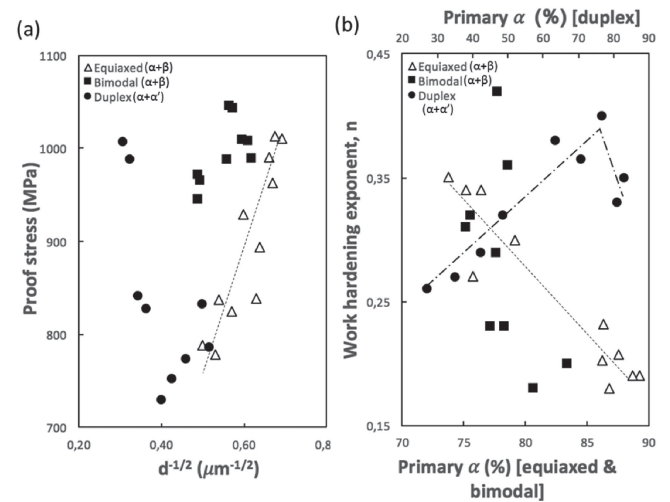


Fig. 5 Effects of (a) grain size on proof stress and (b) primary α fraction on work hardening for the various microstructures.

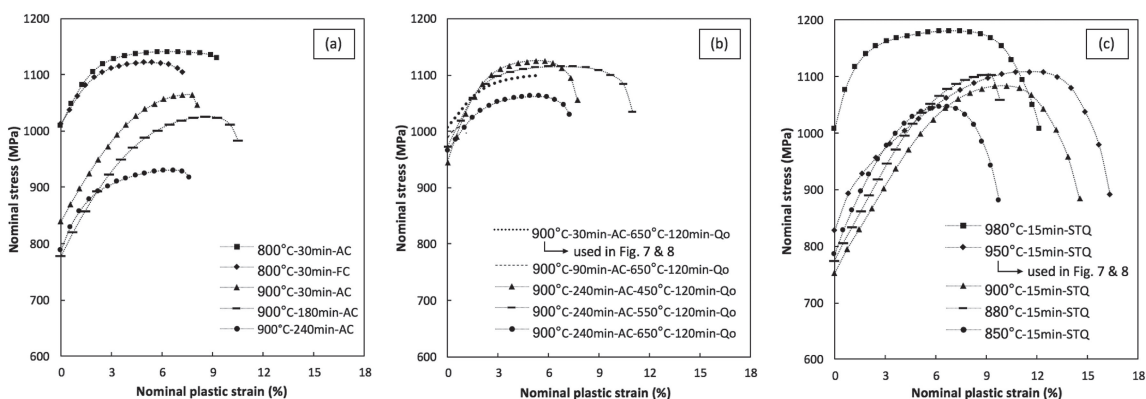


Fig. 4 Examples of nominal stress-plastic strain curves of (a) equiaxed ($\alpha+\beta$), (b) bimodal ($\alpha+\beta$), (c) duplex ($\alpha+\alpha'$) microstructures having different treatment conditions.

成し、初析 α 相の粒径が粗大化している。代表的な応力-ひずみ曲線を Fig. 4(c) (980°C-15 min-STQ) に示すが、特に高強度ではあるものの加工硬化性が小さいことがわかる。他方で溶体化処理温度を低下させることで、わずかな強度低下と加工硬化性が改善される機械的特性の変化が観察される (Fig. 4(c) での 950°C-15 min-STQ)。より詳細には、加工硬化性が著しく増加し、これは、主に α' マルテンサイト量が減少し、初析 α 相量に対する量比のバランスが最適化されることで得られる特性である。このような機械的特性の遷移過程は 880-920°C の間の温度で起きている (Fig. 4(c) では、880°C, 900°C の試料の結果が表示されている)。詳細には (溶体化熱処理温度の低下に伴い)、耐力が低下するものの高い UTS は維持されており、特に加工硬化性が著しく改善される。このような特徴は、とりわけ α' マルテンサイトの相分率が 40-50% 付近で得られている。

組織因子を変数として機械的特性をまとめるために、Fig. 5 は (a) 初析 α 相の粒径を変数とした耐力 ($d^{-1/2} (\mu\text{m}^{-1/2})$) との関係、(b) 初析 α 相の相分率を変数とした加工硬化指数 n との関係性をまとめている。ここで、 n は耐力と UTS の差 Δ と関連した $\Delta[\log(\sigma_{\text{true}})]/\Delta[\log(\epsilon_{\text{true}})]$ の関係式から見積もられた。

Fig. 5(a) から、耐力と初析 α 相の粒径の関係性では等軸 ($\alpha+\beta$) 組織でのみ良い相関性が観察され、Hall-Petch 関係による強化がこの等軸組織でのみで適用されることを示唆している。一方で Bimodal($\alpha+\beta$) 組織および Duplex($\alpha+\alpha'$) 組織では、分散した結果である。また Fig. 5(b) に示されるように、初析 α 相の相分率と加工硬化指数 n の関係性では、初析 α 相の分率が増加するとともに n が減少する様子が観察される。したがって、 β 相量が増加すると、 α 相に比べて β 相で多重すべりがより活性化されるために、より均一変形に寄与することが理解できる。Duplex($\alpha+\alpha'$) 組織に関しては、 α 相分率が約 85% までに増加すると n が著しく増加し、その後では加工硬化指数 n が低下する興味深い現象が観察される。等軸 ($\alpha+\beta$) 組織での結果でも指摘したように、初析 α 相は n が増加する主因子としては全く作用しない (β 相で作用する)。したがって、Duplex($\alpha+\alpha'$) 組織で観察された初析 α 分率の増加に伴う n の増加は、 α' マルテンサイトおよび α/α' 分率のバランスに起因したものと推察される。一方で Fig. 5(b) から、Bimodal($\alpha+\beta$) 組織での加工硬化挙動 (均一変形性と関係) は単純に Bimodal 組織中での初析 $\alpha/(\alpha+\beta)$ ラメラの相量比にはほとんど支配されないことを示唆している。

3.1.3 強度-延性バランスおよび動的な加工硬化性

ここでは、多様な組織因子が強度-延性バランスに及ぼす影響、およびひずみ量に対する加工硬化性の動的な変化についてまとめる。本研究で調査した等軸 ($\alpha+\beta$) 組織、Bimodal($\alpha+\beta$) 組織および Duplex($\alpha+\alpha'$) 組織について定量的に比較した結果を Fig. 6 に示している。これより、明らかに Duplex($\alpha+\alpha'$) 組織において極めて優れた特性を示すことが観察できる。ここではとりわけ、高延性が示される特徴を呈す等軸組織と比較しても Duplex($\alpha+\alpha'$) 組織においてさらに優れた延性 (塑性伸び) を呈すことが特徴である。加えて、Duplex($\alpha+\alpha'$) 組織では Bimodal($\alpha+\beta$) 組織とも同程度の優れた強度 (UTS) を示すことも特徴である。この Duplex($\alpha+\alpha'$) 組織

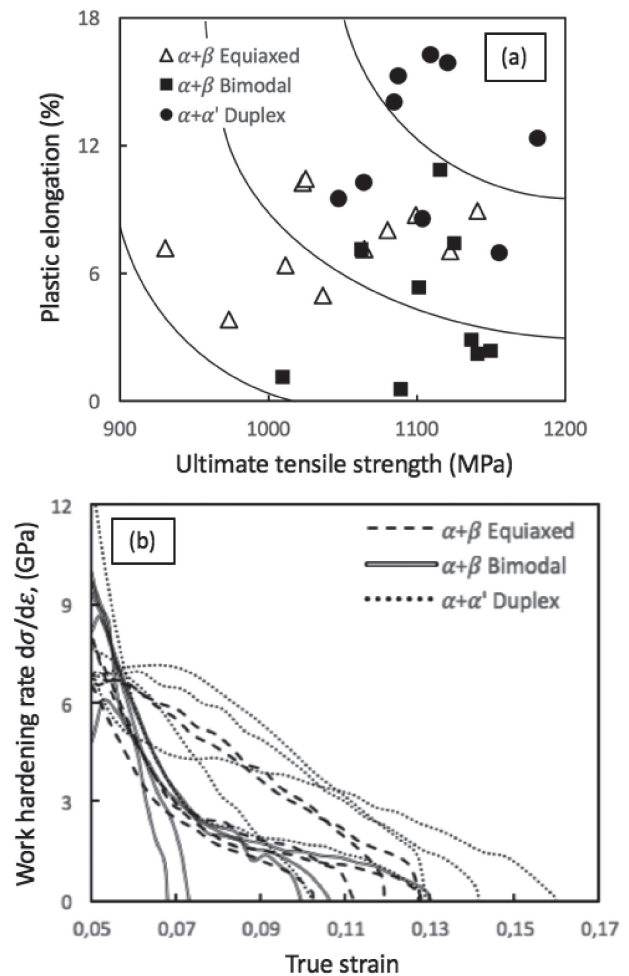


Fig. 6 (a) Plastic elongation - ultimate tensile stress (UTS) balance for different microstructures and (b) Dynamic work hardening rate evolution for different microstructures.

で発現する優れた強度-延性バランスの結果は、Fig. 6(a) で観察されるとおりである。

加えて、動的な加工硬化度を表した Fig. 6(b) で示されるとおり、Duplex($\alpha+\alpha'$) 組織では等軸および Bimodal($\alpha+\beta$) 組織と比較して加工硬化性もまた優れている。実際に動的な加工硬化度を示した曲線 (真ひずみ量 0.7 以上) から Duplex($\alpha+\alpha'$) 組織にて高い値で長いプラトー域が示されている。

3.1.4 幾何学的に必要な転位密度分布

本項では Bimodal($\alpha+\beta$) 組織に比べ Duplex($\alpha+\alpha'$) 組織にて高延性を示す要因について、変形組織のひずみ分布から考察する。Fig. 7 は、引張変形前および塑性ひずみ 5% での引張変形後 (a) Bimodal($\alpha+\beta$) 組織、(b) Duplex($\alpha+\alpha'$) 組織 ((a) 900°C-30 min の熱処理後、650°C-120 min の時効処理した試料、(b) 950°C-15 min での氷水に溶体化焼入れ処理材) の EBSD 局所方位マップで得られた角度頻度をまとめている。これらの熱処理材の塑性流動特性は Fig. 4 に示した通りである。Fig. 7(a) は α 相と β 相における頻度分布、一方で Fig. 7(b) では α 相と α' マルテンサイトにおける頻度分布を示している。同じ HCP 構造から構成される Duplex($\alpha+\alpha'$) 組織については、初析 α 相と α' マルテンサイトについて、それぞれ EBSD データから 20 個の領域を抽出して解析し、その後これら 20 領域のデータを統合化することで各相の頻度分布

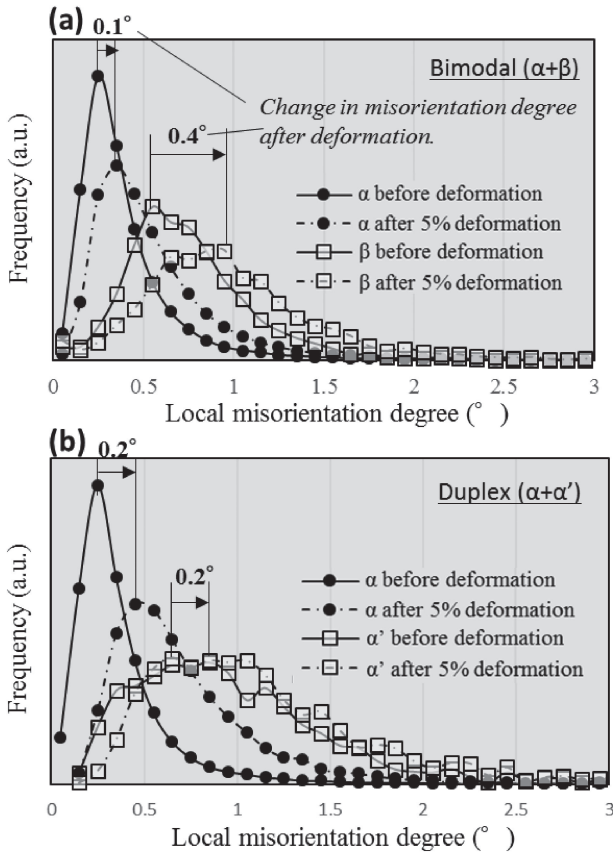


Fig. 7 Distributions of local misorientation estimated by EBSD for (a), (b) the primary α phase and (a) β phase in lamellar ($\alpha+\beta$) region and (b) α' martensite in the duplex ($\alpha+\alpha'$) microstructure of the Ti-6242S alloys before and after tensile deformation at 5% plastic strain. Specimens for (a) 900°C-30 min AC-650°C-120 min OC, (b) 950°C-15 min-STQ.

(Fig. 7(b))を得た。各構成相の変形前後の変化に着眼すると、すべての相でピークシフトが大きく、塑性変形に伴い局所ひずみが蓄積されていることを示唆している。これら2つの組織を比較すると、興味深いことに、Bimodal($\alpha+\beta$)組織では、主要構成相である α 相と比較して β 相で大きなピークシフトが観察される。一方、Duplex($\alpha+\alpha'$)組織では、両構成相でのピークシフトの度合いが同様である。この結果は、Duplex($\alpha+\alpha'$)組織では構成相間において均質なひずみ分配挙動が示され、その結果として、均一変形性が増加していることを示唆している。Fig. 8では、初析 α 相で蓄積される幾何学的に必要な転位(GND)密度の分布を示し(黒色の領域では(a) ($\alpha+\beta$)-ラメラ域、(b) α' 領域に対応している)、これは以下の式で見積もられた。Calcagnottoらによると、局所的なミスオリエンテーション角度は、2つのタイプのらせん転位成分を含むような一連の“cylinder-torsion”のねじり型でのサブグレイン粒界を構成していることから以下の式からGND密度を推定している[40]：

$$\rho_{gnd} = \frac{2\Delta\theta}{\mu b} \quad (1)$$

ここで、 μ はEBSDのステップサイズに相当する単位長さ(本研究では $=0.15\mu\text{m}$)、 b はバーガーズベクトルの大きさ($=2.95 \times 10^{-10}\text{m}$)である。

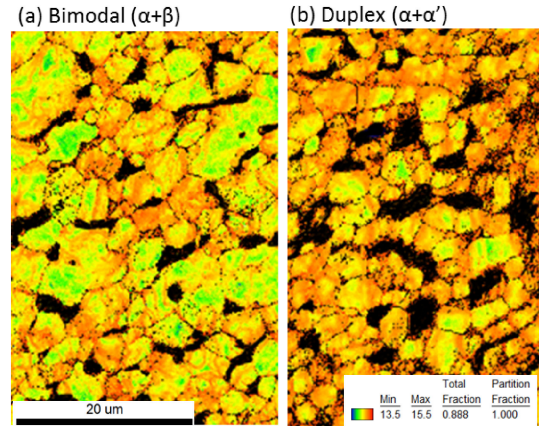


Fig. 8 Distribution of GND density for primary α phase in microstructures after deformation at a plastic strain of 5% of specimens for heat treatment of (a) 900°C-30 min AC-650°C-120 min OC, (b) 950°C-15 min-STQ. (online color)

Fig. 8よりBimodal($\alpha+\beta$)組織では不均質なGND分布(ひずみが多く蓄積された結晶粒とひずみの少ない結晶粒から構成された不均質性)が、一方でDuplex($\alpha+\alpha'$)組織では明らかに均質なGND分布が観察される。したがって、針状 α' マルテンサイトでは、均質にひずみ分配するための緩和機構として有効に作用したことを示唆している。つまり、初析 α 相と α' マルテンサイト間において変形過程におけるひずみ分配挙動にて均質で連続的にひずみ分配が起きていることを示唆している。今後は、このDuplex($\alpha+\alpha'$)組織で発現される高加工硬化性と局所域での均一変形の起源をより詳細に明らかにするためにも、今後の研究では、相界面付近における α' マルテンサイトの局所変形モードにおける作用機構を解明する。

以上より得られた引張特性をまとめると、Duplex($\alpha+\alpha'$)組織の α' マルテンサイト由来で加工硬化性が著しく増加し、均一変形と良好な延性をもたらすことが明らかとなった。加えて、Fig. 5から、加工硬化性を向上させるためには、 α/α' 量比の最適化も必要であることも示された(加工硬化指数を最適に向上させるためには、初析 α 相分率が85%程度が最適であることが明らかとなった)。先述した緒言にて紹介したとおり、 α' マルテンサイト由来で発現する特異な双晶変形である $\{10\bar{1}1\}$ または $\{13\bar{4}1\}$ での双晶は、加工硬化率の向上[10, 19]に重要な役割を果たすはずである。この点に関して、Dumasらは、 $\{13\bar{4}1\}$ 双晶界面から構成する3バリエーションクラスターが塑性過程で高い加工硬化率に寄与することを指摘している[10]。つまり、この $\{13\bar{4}1\}$ 双晶界面が再配向する挙動は、初析 α 分率が85%付近で最適に活性化されることが推察される。重ね、これはDuplex($\alpha+\alpha'$)組織の α' マルテンサイトで生成する上述した3バリエーションクラスター($\{13\bar{4}1\}$ 双晶界面から構成)が形成したことに起因する(Fig. 5(b)のように適切な相量比で発現)。一般的に α' マルテンサイト変態においては12種のバリエーションが形成される。そのために、Fig. 5(b)のような結果に繋がるような高い加工硬化特性を示すためにはバリエーション選択制を制御した組織制御($\{13\bar{4}1\}$ 双晶界面から構成)を行うことが必要となる。この概念を発展させることでTi-6242S合金においてさらに均一変形性を高め

ることが期待でき、将来的な研究ではこれをさらに進展させる予定である。

3.2 機械学習を援用した組織因子と引張特性の定量的関係性

3.2.1 作用因子の重要度

本研究で用いた勾配ブースティング決定木のアーキテクチャを Fig. 9(a) に示し、また得られた特徴量解析の結果を Fig. 9(b) にまとめており、各組織因子の特徴量の重要度をまとめている。ここでは、形態(等軸(α+β), Bimodal(α+β), Duplex(α+α')), α相分率(初析α相の割合), 初析α粒の平均径のこれら3つの組織因子を用いた。この特徴量では、初析α相の分率については逆に等軸組織ではβ分率の影響にも相当し、また Bimodal 組織では(α+β)ラメラの割合, Duplex(α+α')組織ではα' マルテンサイトの割合の影響にも相当することとなる。

結果に対する教師あり機械学習での直接的な“lecture”では、出力結果に対してモデル自体が精緻に予測するためにも各パラメータがどの程度重要となるかを決定するものであり、これは留意すべきである。結果として、各パラメータにおいては構成モデルにおける敏感性を指し示すこととなる。

機械学習を援用した結果、塑性伸びの回帰では組織の種類(形態因子)が最も重要な影響因子であることが判定され、一方で初析α分率と結晶粒径の影響度は小さいことがわかった。これは、3つの組織(等軸組織, Bimodal(α+β)組織, Duplex(α+α')組織)の間でも組織因子の影響(実験結果)で強く相関性が観察されない結果とも一致する。つまりは組織での

形態因子が特性に強く影響することを暗に意味する。耐力については、形態因子およびα相分率の両者がとりわけ支配因子として重要である。一方で、粒径の影響度は極めて小さいこともわかる。これについては先述した実験結果からもわかるとおり、等軸組織においては Hall-Petch 則に従う相関性があったにも関わらず、一方で Bimodal(α+β)組織および Duplex(α+α')組織では粒径との相関性がほとんど観察されないために、総合的に粒径の影響は小さく、逆に形態因子が重要と判定されたものと推察される。これより耐力の回帰においては、粒径よりも形態の方が影響因子として重要視されることがわかった。他方で UTS においては、α相分率が最も影響度の高い重要因子であると判定され、この結果では特に等軸組織および Duplex(α+α')組織で得られた実験結果と相関した結果である。ここでの回帰結果で、粒径の影響度はα相分率の結果と比較して2倍程度重要度は低いものの、粒径の影響が無視できるほどに小さいわけではないことは付記しておく。最後に、加工硬化度の結果においてはα相分率および粒径の両者の影響度が高く判定されている(どちらかというα相分率の方が重要度が高い)。直感的には、αの相分率の重要度は粒径に比べより大きく支配的であるように思われるが、相分率と粒径の線形的な関係性(特に Duplex(α+α')組織で観察)を鑑みると、回帰の結果として粒径の重要度が過大評価された可能性も高いことは指摘しておく。以上から、機械学習の解析アプローチを駆使することにより、組織因子と機械的特性の関係性をより精緻に関係付けることができ、加えて、両者の相関性を定量化した組織因子の影響を解析することができた。

3.2.2 交差検証

実施した機械学習モデルの精度を検証するために、80%の実験データを訓練用として、一方で20%の実験データをテスト用に分割して交差検証を実施した。本研究ではデータセット数が極めて少ないために、交差検証の結果では考慮した分割数にも強く依存する。そのため、より精緻に交差検証を実施するためにもここでは独自の交差検証手法(ここでは Leave-P-Out 交差検証法に近い手法)を用い、合計1000通りの分割を作成・すべてのパターンで交差検証を実施した(Fig. 10(a))。これより耐力、塑性伸び、加工硬化度、および UTS の結果について、それぞれ 0.85, 0.57, 0.48, および 0.41 の平均スコア(決定係数 R²)が得られた。また検証スコア(R²)における分割した結果は Fig. 10(b) に示すとおりである。

さらに、MSE(平均二乗誤差)はモデルの妥当性を議論する上で有効な指標であり、耐力、UTS、塑性伸び、および加工硬化指数の MSE はそれぞれ 38.3(MPa), 41.9(MPa), 2.54(%), 0.047(-)の誤差が確認された。またモデルには反映されないデータ(テストデータ)を用いて目標値を予測した際、相対誤差に変換した結果、それぞれは 4.26%, 3.85%, 28.5%, 16.0%であった。実際には、機械学習での予測モデルが完全に適合できているのかを精度よく確認することは困難であるものの、これらの相関係数(R², MSE)の結果を鑑みて、ある程度信頼できる機械学習の結果が得られたと判断できる。しかしながら、さらに信頼性を高めるためにはサンプルデータや組織因子の数を増やすなどして、本質的にデータ

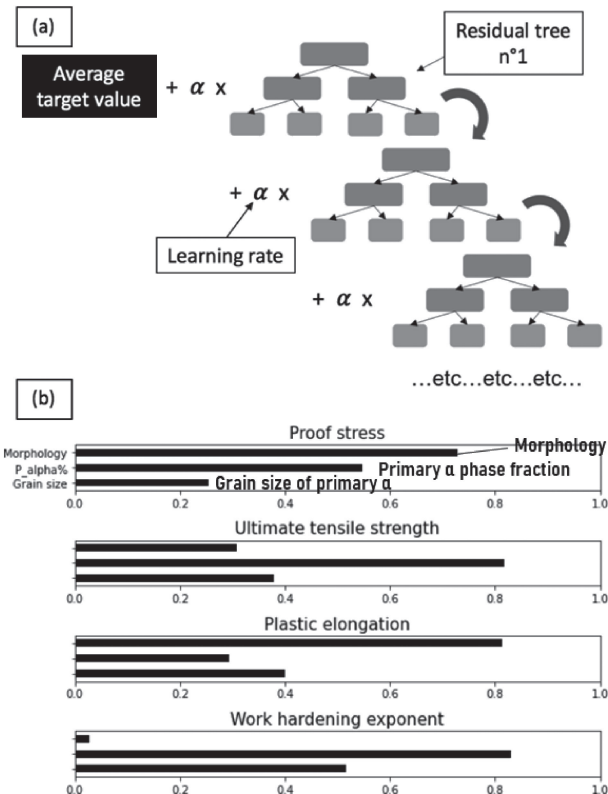


Fig. 9 (a) Gradient boosting regression tree diagram, (b) Feature importance results of the microstructural parameters.

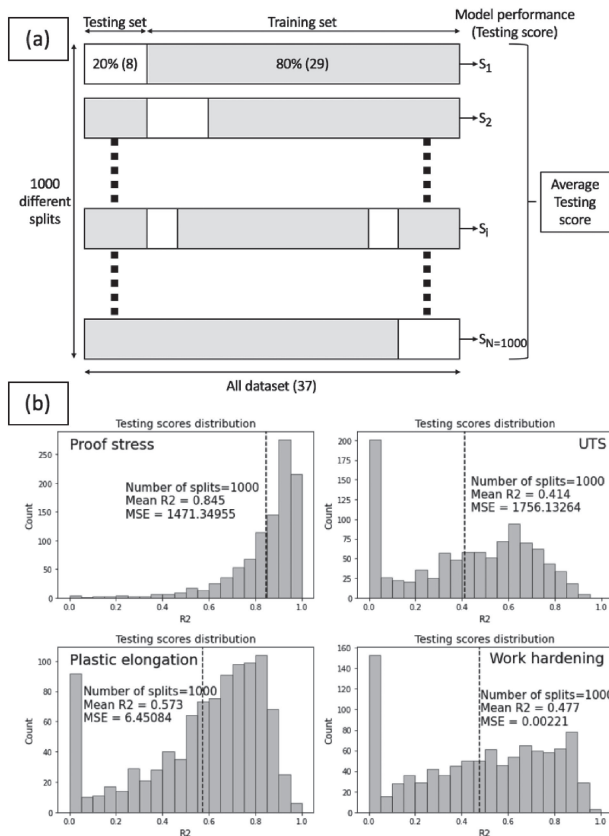


Fig. 10 (a) Cross-validation scheme, (b) Testing scores distributions for the different mechanical properties.

セット数そのものを増加するなどの改善が必要であることは言うまでもない。

交差検証にて異なるテストスプリットから得られた重要度解析の結果では、データセット全体から推定される重要度の結果とも同様であった。そのため、テスト検証において十分な信頼性あるスコアが得られていない場合であっても（データセットが極めて少ない状況）、本研究ではある程度信頼できる重要度解析ができていた。繰り返しにはなるが、様々な機械学習のアルゴリズムの中で本研究で採用した勾配ブースティング決定木は、組織因子（例えば粒径と α 相分率）が機械的特性（耐力、UTS、塑性伸び、加工硬化性）にどのように影響するかを推定する上で補完的な手法になり得る。粒径および α 相分率はともに機械的特性に強く影響するため、実験結果のみからでは影響度・関係性を定量化することは困難ではあるが、機械学習を駆逐することで精度よく影響度を定量化できたことは価値ある結果であると判断できる。

4. 結 論

Ti-6Al-2Sn-4Zr-2Mo-Si (Ti-6242S) 合金の等軸 ($\alpha+\beta$)、Bimodal($\alpha+\beta$)組織および Duplex($\alpha+\alpha'$)組織における特性を体系的に評価した。本研究では、結晶粒径、組織形態、 α/β または α/α' の相量比などの組織因子を、静的熱処理条件を多様に制御することで様々な変化させ、これらの組織に対して引張特性（強度、延性、加工硬化性）を評価した。例えば、Duplex($\alpha+\alpha'$)組織の熱処理では、溶体化焼入れ処理温度を低下すること

で、初析 α 相の結晶粒径が微細化され、他方で生成する α' マルテンサイトの形成量が低下する（逆に初析 α 相の分率が増加する）。

多様な組織因子と引張特性の関係性について、等軸組織における関係性では、微細化に伴い強度は制御（増加）できること（Hall-Petch 則）、また β 相によって加工硬化性が改善されることが示された。等軸($\alpha+\beta$)組織は、Bimodal($\alpha+\beta$)組織および Duplex($\alpha+\alpha'$)組織と比較して、強度は平均的ではあったが、加工硬化性に優れ、特に高延性（高い塑性伸び）であることが特徴付けられた。一方、Bimodal($\alpha+\beta$)組織の場合では、高強度（ただし加工硬化性は小さい）を示す特徴がある。実験結果においては機械的特性と組織因子の関係性で強い相関性は観察されていない。他方で、Duplex($\alpha+\alpha'$)組織については、 α' マルテンサイトの生成量により、強度および加工硬化性が大きく変化することが明らかとなった。さらに、Duplex($\alpha+\alpha'$)組織では総じて良好な延性を呈しており、加えて強度と加工硬化性のバランスに着眼すると、特に優れた特性を呈していたことがわかった。

まとめると、本研究で準備した3つの組織形態を比較すると、Duplex($\alpha+\alpha'$)組織にて特に優れた加工硬化性と強度-延性バランスを呈することが明らかとなった。

本研究ではまた機械的特性に作用する組織因子の影響・関係性を定量的に解明するために、機械学習を援用して評価・解析した。ここでは勾配ブースティング決定木を用いた機械学習により、機械的特性（耐力、UTS、塑性伸び、加工硬化性）における組織形態（形態種）、結晶粒径、相量比の影響度（重要度）を評価した。Ti-6242S合金の機械的特性における作用機構の理解を深めるために、組織因子の特徴量の重要度を分析し、加えて交差検証法により回帰した結果の妥当性を検討した。その結果、耐力においては精緻に予測・回帰することができた。一方で塑性伸び、加工硬化性、UTSにおいてはある程度よい精度で回帰することはできるものの、より信頼性を向上させるためにもデータセット数を増やす必要があることが示された。

本研究の一部は、（公財）軽金属奨学会課題研究（2022-C2-1）の助成を受けて実施された。ここに謝意を表する。

文 献

- [1] G. Lütjering, J.C. Williams and A. Gysler: Microstructure and Mechanical Properties of Titanium Alloys, *Microstructure and Properties of Materials*, ed. by J.C.M. Li, (World Scientific, Singapore, 2000) pp. 1-77.
- [2] P. Pushp, S.M. Dasharath and C. Arati: Classification and applications of titanium and its alloys, *Mater. Today: Proc.* **54** (2022) 537-542.
- [3] M. Peters, J. Hemptenmacher, J. Kumpfert and C. Leyens: Structure and Properties of Titanium and Titanium Alloys, *Titanium and Titanium Alloys: Fundamentals and Applications*, ed. by C. Leyens and M. Peters, (Wiley-VCH, Weinheim, 2003) pp. 1-36.
- [4] M.T. Jia, D.L. Zhang, B. Gabbitas, J.M. Liang and C. Kong: A novel Ti-6Al-4V alloy microstructure with very high strength and good ductility, *Scr. Mater.* **107** (2015) 10-13.
- [5] X.P. Ren, H.Q. Li, H. Guo, F.L. Shen, C.X. Qin, E.T. Zhao and X.Y. Fang: A comparative study on mechanical properties of Ti-6Al-4V alloy processed by additive manufacturing vs. traditional processing, *Mater. Sci. Eng. A* **817** (2021) 141384.
- [6] Y. Chong, T. Bhattacharjee, J. Yi, S. Zhao and N. Tsuji: Achieving bi-

- lamellar microstructure with both high tensile strength and large ductility in Ti-6Al-4V alloy by novel thermomechanical processing, *Materialia* **8** (2019) 100479.
- [7] R.R. Boyer: An overview on the use of titanium in the aerospace industry, *Mater. Sci. Eng. A* **213** (1996) 103-114.
- [8] R.K. Gupta, C. Mathew and P. Ramkumar: Strain Hardening in Aerospace Alloys, *Frontiers in Aerospace Engineering* **4**(1) (2015) 1-13.
- [9] Y. Chong, G. Deng, J. Yi, A. Shibata and N. Tsuji: On the strain hardening abilities of $\alpha+\beta$ titanium alloys: The roles of strain partitioning and interface length density, *J. Alloy. Compd.* **811** (2019) 152040.
- [10] O. Dumas, L. Malet, B. Hary, F. Prima and S. Godet: Crystallography and reorientation mechanism upon deformation in the martensite of an $\alpha-\alpha'$ Ti-6Al-4V dual-phase microstructure exhibiting high work-hardening rate, *Acta Mater.* **205** (2021) 116530.
- [11] Q. Zhao, L. Bolzoni, Y. Chen, Y. Xu, R. Torrens and F. Yang: Processing of metastable beta titanium alloy: Comprehensive study on deformation behaviour and exceptional microstructure variation mechanisms, *J. Mater. Sci. Technol.* **126** (2022) 22-43.
- [12] J. Wang, W. Xiao, Y. Fu, L. Ren and C. Ma: Dependence of mechanical behavior on grain size of metastable Ti-Nb-O titanium alloy, *Prog. Nat. Sci.: Mater. Int.* **32** (2022) 63-71.
- [13] Z. Wang, L. Liu, L. Zhang, J. Sheng, D. Wu and M. Yuan: Effect of Heat Treatment on the Microstructure and Mechanical Properties of High-Strength Ti-6Al-4V-5Fe Alloy, *Mater. Trans.* **60** (2019) 269-276.
- [14] Z.W. Huang, P.L. Yong, H. Zhou and Y.S. Li: Grain size effect on deformation mechanisms and mechanical properties of titanium, *Mater. Sci. Eng. A* **773** (2020) 138721.
- [15] Y. Chong, G. Deng, S. Gao, J. Yi, A. Shibata and N. Tsuji: Yielding nature and Hall-Petch relationships in Ti-6Al-4V alloy with fully equiaxed and bimodal microstructures, *Scr. Mater.* **172** (2019) 77-82.
- [16] J.Y. Jung, J.K. Park, C.H. Chun and S.M. Her: Hall-Petch relation in two-Phase TiAl alloys, *Mater. Sci. Eng. A* **220** (1996) 185-190.
- [17] H. Takebe and K. Ushioda: Effects of Grain Size, Thickness and Tensile Direction on Ductility of Pure Titanium Sheet, *Mater. Trans.* **62** (2021) 952-961.
- [18] H. Matsumoto, D. Tadokoro and I. Séchepée: Strength and Ductility Balance of a Ti-5Al-2Sn-2Zr-4Cr-4Mo (Ti-17) Alloy with Various Microstructures: Experiment and Machine Learning, *ISIJ Int.* **61** (2021) 2844-2854.
- [19] S. Cao, R. Chu, X. Zhou, K. Yang, Q. Jia, C.V.S. Lim, A. Huang and X. Wu: Role of martensite decomposition in tensile properties of selective laser melted Ti-6Al-4V, *J. Alloy. Compd.* **744** (2018) 357-363.
- [20] J. Su, X. Ji, J. Liu, J. Teng, F. Jiang, D. Fu and H. Zhang: Revealing the decomposition mechanisms of dislocations and metastable α' phase and their effects on mechanical properties in a Ti-6Al-4V alloy, *J. Mater. Sci. Technol.* **107** (2022) 136-148.
- [21] H. Matsumoto, H. Yoneda, K. Sato, S. Kurosu, E. Maire, D. Fabregue, T.J. Konno and A. Chiba: Room-temperature ductility of Ti-6Al-4V alloy with α' martensite microstructure, *Mater. Sci. Eng. A* **528** (2011) 1512-1520.
- [22] T. Morita, K. Hatsuoka, T. Iizuka and K. Kawasaki: Strengthening of Ti-6Al-4V Alloy by Short-Time Duplex Heat Treatment, *Mater. Trans.* **46** (2005) 1681-1686.
- [23] C. de Formanoir, G. Martin, F. Prima, S.Y.P. Allain, T. Dessolier, F. Sun, S. Vivès, B. Hary, Y. Bréchet and S. Godet: Micromechanical behavior and thermal stability of a dual-phase $\alpha+\alpha'$ titanium alloy produced by additive manufacturing, *Acta Mater.* **162** (2019) 149-162.
- [24] T. Shiraiwa, Y. Miyazawa and M. Enoki: Prediction of Fatigue Strength in Steels by Linear Regression and Neural Network, *Mater. Trans.* **60** (2018) 189-198.
- [25] J. Syarif, Y.P. Detak and R. Ramli: Modeling of Correlation between Heat Treatment and Mechanical Properties of Ti-6Al-4V Alloy Using Feed Forward Back Propagation Neural Network, *ISIJ Int.* **50** (2010) 1689-1694.
- [26] S. Guo, J. Yu, X. Liu, C. Wang and Q. Jiang: A predicting model for properties of steel using the industrial big data based on machine learning, *Comput. Mater. Sci.* **160** (2019) 95-104.
- [27] S. Malinov, W. Sha and J.J. McKeown: Modelling the correlation between processing parameters and properties in titanium alloys using artificial neural network, *Comput. Mater. Sci.* **21** (2001) 375-394.
- [28] J.S. Suh, B.-C. Suh, S.E. Lee, J.H. Bae and B.G. Moon: Quantitative analysis of mechanical properties associated with aging treatment and microstructure in Mg-Al-Zn alloys through machine learning, *J. Mater. Sci. Technol.* **107** (2022) 52-63.
- [29] C. Dumortier and P. Leher: Statistical Modelling of Mechanical Tensile Properties of Steels by Using Neural Networks and Multivariate Data Analysis, *ISIJ Int.* **39** (1999) 980-985.
- [30] C. McElfresh, C. Roberts, S. He, S. Prikhodko and J. Marian: Using machine-learning to understand complex microstructural effects on the mechanical behavior of Ti-6Al-4V alloys, *Comput. Mater. Sci.* **208** (2022) 111267.
- [31] Z.-L. Wang, T. Ogawa and Y. Adachi: Properties-to-microstructure-to-processing Inverse Analysis for Steels via Machine Learning, *ISIJ Int.* **59** (2019) 1691-1694.
- [32] I.S. Markham and T.R. Rakes: The effect of sample size and variability of data on the comparative performance of artificial neural networks and regression, *Computers Ops. Res.* **25** (1998) 251-263.
- [33] Y. Zhang and A. Haghani: A gradient boosting method to improve travel time prediction, *Transp. Res. Part C Emerg. Technol.* **58** (2015) 308-324.
- [34] P. Körner, R. Kronenberg, S. Genzel and C. Bernhofer: Introducing Gradient Boosting as a universal gap filling tool for meteorological time series, *Meteorologische Zeitschrift* **27** (2018) 369-376.
- [35] A. Altmann, L. Toloşi, O. Sander and T. Lengauer: Permutation importance: a corrected feature importance measure, *Bioinformatics* **26** (2010) 1340-1347.
- [36] J.S. Jha, S.P. Toppo, R. Singh, A. Tewari and S.K. Mishra: Deformation behavior of Ti-6Al-4V microstructures under uniaxial loading: Equiaxed Vs. transformed- β microstructures, *Mater. Charact.* **171** (2021) 110780.
- [37] Y. Zhang, S. Fang, Y. Wang and D. Zhang: Enhancement of tensile strength and ductility of titanium with a bimodal structure, *Mater. Sci. Eng. A* **803** (2021) 140701.
- [38] S. Sun, D. Zhang, S. Palanisamy, Q. Liu and M.S. Dargusch: Mechanical properties and deformation mechanisms of martensitic Ti6Al4V alloy processed by laser powder bed fusion and water quenching, *Mater. Sci. Eng. A* **839** (2022) 142817.
- [39] J.C. Williams, R. Tagart and D.H. Polonis: The morphology and substructure of Ti-Cu martensite, *Metall. Trans.* **1** (1970) 2265-2270.
- [40] M. Calcagnotto, D. Ponge, E. Demir and D. Raabe: Orientation gradients and geometrically necessary dislocations in ultrafine grained dual-phase steels studied by 2D and 3D EBSD, *Mater. Sci. Eng. A* **527** (2010) 2738-2746.